



TITLE:

# フラクタル系のダイナミクス(ランダムなフラクタル・パターンの成長機構と統計,研究会報告)

AUTHOR(S):

矢久保, 考介; 中山, 恒義

---

CITATION:

矢久保, 考介 ...[et al]. フラクタル系のダイナミクス(ランダムなフラクタル・パターンの成長機構と統計,研究会報告). 物性研究 1990, 54(1): 30-43

ISSUE DATE:

1990-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94004>

RIGHT:

## フラクタル系のダイナミクス\*

北海道大学 工学部 矢久保 考 介  
中 山 恒 義

(1989年3月 受付)

## 1. はじめに

パーコレーション・システムは、統計的自己相似性を持つランダム構造の最も基本的なモデルである。これは、適当な格子上にランダムに確率  $p$  で点を配置し、もし、ある点の最近接に点が存在すれば、その2つの点を線（ボンド）で結ぶという極めて単純な規則に従って形成される系である（サイト・パーコレーション）。パーコレーション（浸透）という名の通り、確率  $p$  を0から徐々に大きくしていくと、ボンドで結ばれたクラスターの平均サイズは次第に大きくなり、ある特別の濃度  $p_c$  のところで発散（浸透）する。この濃度  $p_c$  は、熱力学的相転移における臨界温度と同様の意味を持つことから、臨界濃度と呼ばれている。臨界濃度近傍におけるパーコレーション・クラスターの幾何学的振舞いは、少数の独立な臨界指数によって記述できることが以前から知られている。これらの指数は、ランダムな構造を持つ物質を理解する上で重要であり、様々な研究がなされている（Stauffer (1985)）。

パーコレーション・システムが、 $p_c$  近くで臨界的に振舞うということは、 $p_c$  近傍における系がフラクタル的であることを意味する。近年、このフラクタルという概念を積極的に利用し、ランダム系を統一的に理解しようとする試みがなされている。特に、拡散、振動、波動などの動的性質に関する研究は、この数年間でめざましい発展を遂げている。de Gennes (1976) は、ランダム系の様々なダイナミクスを知るためには、その系での拡散現象を理解すればよいことを示した。その後、Gefen et al. (1983)により、フラクタル・ネット上での拡散に対するスケーリング理論が与えられ、これに基づいたダイナミクスのスケーリング理論が多くの研究者によって示された。その中で最も興味深い議論の一つに“フラクトン励起”の議論がある。フラクトンとは、Alexander and Orbach (1982)によって命名されたフラクタル系に特有な励起で、均質系における励起とは全く異なる状態密度を持ち、そのモードは空間的に局在している（Rammal and Toulouse (1983)）。このような励起は、振動系や、電子系など異なる物理系で同じように存在すると思われているが、以下では振動問題に限って議論することにする。

我々は、スーパーコンピュータを用いた大規模なシミュレーションを行なうことによって、巨大なパーコレーション・クラスター上にフラクトンを励起することに成功した。これにより、フラクトンの振動状態密度とフラクトン波動関数を求めた。その結果、状態密度はスケーリング理論による予測と一致し、フラクトンという励起が実際に存在することが明らかになったが、その波動関数は、理論的に考えられていたようなものとは異なることが分かった。

次章以後の構成は次の通りである。第2章では、フラクトン励起に対するスケーリングの議論を簡単に紹介し、フラクトンとは如何なる励起かを説明する。さらにフラクトン波動関数に

---

\* 本稿は、統計数理研究所 共同研究 (63-共会-51) における発表に基づくものである。

について、どのような予想がなされているかを概観する。第3章では、我々が用いたシミュレーションのアルゴリズムについて述べ、それによって計算された結果を第4章で示す。第5章は結論であり、特に、フラクタルのモード・パターンに関する我々の結果と、従来の理論との相違の原因について議論される。

## 2. フラクトン励起のスケーリング理論

フラクタル系のダイナミクスが、系の拡散と密接に関連していることは上で述べた。拡散を支配するマスター方程式から振動の状態密度を求める議論は、Alexander and Orbach (1982) により与えられているが、本稿では、別の方法でフラクトン状態密度を求めてみよう。Alexander と Orbach による議論は、スカラー変位のみを有する系に適用されるが、以下で述べる方法では、より一般的なベクトル変位に対しても有効である。ここでは、系が

$$(2.1) \quad H = \frac{1}{2} \alpha \sum_{\langle ij \rangle} g_{ij} [(u_i - u_j) \cdot r_{ij}]^2 + \frac{1}{2} \beta \sum_{\langle ijk \rangle} g_{ij} g_{ik} (\delta\theta_{jik})^2$$

で記述されているとして考える。第一項は、ボンド伸長 (stretching) 力を記述する項であり、 $\alpha$  がその強さを表している。 $g_{ij}$  はサイト  $i$  と  $j$  の両方が占有されているときには1、それ以外ときには0をとるものとする。また、 $u_i$  はサイト  $i$  の変位であり、 $r_{ij}$  はサイト  $i$  から  $j$  へ向かう単位ベクトルを表す。第二項は、ボンド変角 (bending) 力を表しており、 $\beta$  はその力定数である。 $\delta\theta_{jik}$  はボンド  $\langle ij \rangle$  とボンド  $\langle ik \rangle$  の間の角の平衡からのずれを表している。和は最近接格子点すべてについてとられる。

さて、パーコレーション系を記述するためのモデルとして nodes-links-blobs model がある (Stanley (1977), Coniglio (1981), Kantor and Webman (1984), Feng (1985), Webman and Grest (1985)). これは、複雑なパーコレーション・ネットワーク (図1(a)) を一辺が  $\xi_p$  (相関長) の規則的ネットワークと見なし、その一辺が図1(b)のような内部構造を持っているようなモデルである。相関長はパーコレーション系に唯一の特徴的長さであり、 $p < p_c$  ではクラスターの大きさ、 $p > p_c$  ではボイドの大きさの程度を与える。node とは図1(b)の●で示されるような結節点を指している。また、link とはその一本を切断すると辺が二分されるようなボンドをいう。それ以外の、多重に連結したボンド部分が blob である。この nodes-links-blobs によるネットワークをさらに図1(c)のように有効バネ定数  $K$  のバネによる規則的ネットワーク構造と見なししてしまう。有効バネ定数を正確に評価することは難しいが、blobs を剛体

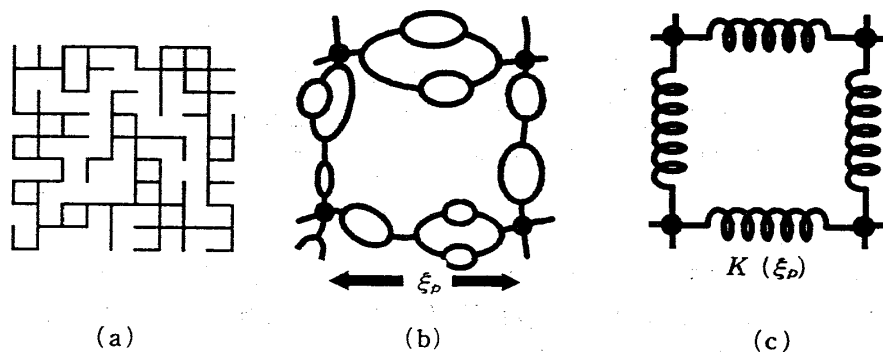


図1. Nodes-links-blobs model: 元のパーコレーション・クラスター (a) の骨格 (back bone) を nodes と links と blobs による (b) のような構造と考える。さらに、これを有効バネ定数  $K(\xi_p)$  の規則格子 (c) と見なす。

と考えることによって,

$$(2.2) \quad K^{-1} \sim \left(\frac{\alpha}{L_1}\right)^{-1} + \left(\frac{\beta}{L_1 \xi_p^2}\right)^{-1}$$

と表せる (Kantor and Webman (1984), Feng (1985), Webman and Grest (1985)). ここで,  $L_1$  は link の総数であり,  $L_1$  の濃度依存性は

$$(2.3) \quad L_1 \sim (p - p_c)^{-1}$$

であることが Coniglio(1981)によって報告されている. (2.2)式から重要な結論が引き出せる. すなわち, 変角力を含むパーコレーション系には, 新たに

$$(2.4) \quad d_c \sim \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{1/2}$$

で定義される特徴的長さが生まれることになる. 相関長  $\xi_p$  が  $\xi_p \ll d_c$  であれば, (2.2)式より

$$(2.5) \quad K \sim \frac{\alpha}{L_1}$$

となり, 変位による弾性エネルギーはボンドの伸長が担うことになり,  $\xi_p \gg d_c$  ならば逆に, ボンドの変角の効果が主になり,

$$(2.6) \quad K \sim \frac{\beta}{L_1 \xi_p^2}$$

となる. このような新しい長さ  $d_c$  が存在することにより, 系の振動の状態密度は,  $\xi_p$ ,  $d_c$ ,  $\lambda$  (波長) の大小関係に大きく依存することになる.

さて, 有限サイズ  $L$  ( $\ll \xi_p$ ) のパーコレーション・クラスターを考えよう. この系の最低振動数近傍における状態密度は

$$(2.7) \quad \rho(\omega, L) \sim \frac{1}{L^D \Delta\omega}$$

で与えられる.  $D$  はフラクタル次元であり, 従って  $L^D$  は系の体積に比例する. また,  $\Delta\omega$  は最小固有値  $\omega_{\min}$  近くの固有値間隔である. 状態密度が(2.7)式で表されるためには, エネルギー固有値に縮退がないことが仮定されるが, パーコレーション系の非対称性に起因する準位反発のため, この条件は満足されていると考えられる.  $\Delta\omega$  はこのとき,  $\omega_{\min}$  と置き換えられるから,

$$(2.8) \quad \Delta\omega \sim \omega_{\min} \sim \left(\frac{K(L)}{M(L)}\right)^{1/2}$$

として与えられる. ここで,  $M(L)$  は系の質量,  $K(L)$  は系の有効バネ定数であり, (2.2)式の  $\xi_p$  を  $L$  で置き換えたもので与えられる. このとき,  $L_1$  の  $L$  依存性が必要になるが, これは有限サイズ・スケーリングの議論を (2.3)式に適用することにより,

$$(2.9) \quad L_1 \sim L^{1/\nu}$$

となる. ここで,  $\nu$  は相関距離に対する指数である ( $\xi_p \sim |p - p_c|^{-\nu}$ ). システム・サイズ  $L$  が  $L \ll d_c$  であれば, (2.5)式より有効バネ定数  $K(L)$  は  $\alpha/L_1$  に比例し,  $L \gg d_c$  ならば (2.6)式より  $K(L) \sim \beta/(L_1 L^2)$  となるので, (2.5)-(2.9) 式より,

$$(2.10) \quad \rho(\omega_{\min}, L) \sim \omega_{\min}^{\frac{D}{2}-1}$$

と書ける。ただし、 $\bar{d}$  は

$$(2.11) \quad \bar{d} = \begin{cases} \frac{2D}{2+(t-\beta)/\nu} ; & L \ll d_c \\ \frac{2D}{2+(f-\beta)/\nu} ; & L \gg d_c \end{cases}$$

$$(2.12)$$

である。ここで、 $t$  は伝導度の指数で、 $f$  は変角力がある系の弾性定数の指数である。このように、系の大きさによって最低振動数近くでの状態密度は異なる振動数依存性を示すことになる。このことから、無限に大きなパーコレーション系に励起された振動数  $\omega$  近くの振動の状態密度を考えることができる。この振動の波長を  $\lambda$  とすると、 $\omega$  近傍の状態密度は有限なサイズ  $\lambda$  のパーコレーション系の最低振動数  $\omega_{\min}$  近くでの状態密度に等しい。従って、無限系での状態密度として、

$$(2.13) \quad g(\omega) \sim \omega^{\bar{d}-1}$$

が得られる。ただし、(2.11), (2.12)式に対応して、

$$(2.14) \quad \bar{d} = \begin{cases} \frac{2D}{2+(t-\beta)/\nu} = \bar{d}_s ; & \omega \ll \omega_{sv} \\ \frac{2D}{2+(f-\beta)/\nu} = \bar{d}_v ; & \omega \gg \omega_{sv} \end{cases}$$

$$(2.15)$$

である。 $\omega_{sv}$  は、波長が  $d_c$  程度となるクロスオーバー振動数であり、(2.8), (2.9)式から得られる分散関係

$$(2.16) \quad \omega(k) \sim k^{D/\bar{d}}$$

を用いると、 $\omega_{sv}$  は

$$(2.17) \quad \omega_{sv} \sim d_c^{-D/\bar{d}_s}$$

と振舞うことが分かる。(2.14), (2.15)式で定義される  $\bar{d}$  をフラクトン次元と呼ぶ。(2.13), (2.14)式の状態密度を持つ励起には、おもに系の伸長力が関与しているが、このフラクトン次元はスカラー変位のフラクトン次元と同じである。これより、(2.13), (2.14)式で記述される励起をスカラー・フラクトン、また、(2.13), (2.15)式のようなベクトル変位特有の状態密度を持つ励起をベクトル・フラクトンと呼ぶことにする。

臨界濃度以上のパーコレーション系を考えてみよう。このとき、系を評価する尺度が相関長  $\xi_p$  よりも長いかわりに短くなるによって構造は変わってくる。 $\xi_p$  よりも短いスケールでは、系はフラクタルであり、これよりも長くなると一様構造として見えてくる。従って、もし、パーコレーション系における振動励起の波長が  $\xi_p$  よりもはるかに長ければ、励起は一様な有効媒質中のフォノンとして振舞うであろうし、波長が  $\xi_p$  よりも短ければ、フラクトンが励起されることになるであろう。そして両者は、適当な振動数のところでクロスオーバーすることになる。このクロスオーバー振動数  $\omega_{pf}$  は

$$(2.18) \quad \omega_{pf} \sim \xi_p^{-D/\bar{d}_s} ; \text{フォノン-スカラー・フラクトン クロスオーバー}$$

$$(2.19) \quad \omega_{pf} \sim \xi_p^{-D/\bar{d}_v} ; \text{フォノン-ベクトル・フラクトン クロスオーバー}$$

のようにスケールされる。

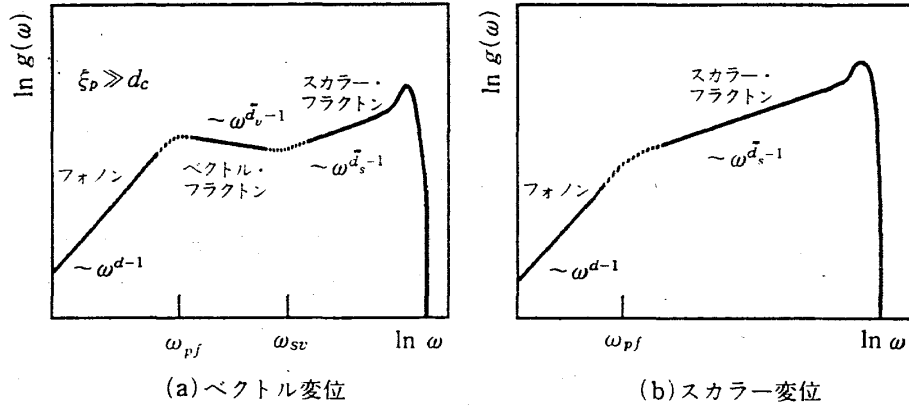


図2. パーコレーション系の状態密度の模式図: (a) 変角力のある系での  $\xi_p \gg d_c$  に対する状態密度. (b) スカラー変位での状態密度.

さて、パーコレーション・クラスター上に励起されたフラクトンのフラクトン次元は、他の臨界指数  $\beta$ ,  $\nu$ ,  $D$ ,  $t$ ,  $f$  を数値的に求めることにより得ることができる. Alexander and Orbach (1982) は、こうして求めたスカラー・フラクトンのフラクトン次元  $\bar{d}_s$  がほとんど空間次元  $d$  に依存せず 1.3 近くの値をとることから、正しい  $\bar{d}_s$  は  $d$  によらず  $4/3$  であると予想した. また、ベクトル・フラクトンの次元  $\bar{d}_v$  は、2次元パーコレーション系で 0.8, 3次元で 0.9 の値をとることが知られている. このとき、フラクトン次元が 1 より小さくなるため、低振動数での状態密度の様子はデバイ理論 ( $g(\omega) \sim \omega^{d-1}$ ) で記述されるフォノンとは著しく異なる.  $\xi_p$ ,  $d_c$ ,  $\lambda$  は、各々濃度  $p$ , 伸長力と変角力の力定数の比, および振動数を変化させることで変えることができる. 系の状態密度は、これらの組み合わせにより様々な振舞いを見せることになる. 図2(a)と(b)は  $\xi_p \gg d_c$  で  $p \neq p_c$  の状態密度と、スカラー変位のみ  $p \neq p_c$  での状態密度を模式的に示している. 後に述べるように、我々のシミュレーションはスカラー変位のみの場合について行なわれた.

フラクトン励起の特徴は、状態密度だけではない. パーコレーション上のフラクトンは、常に局在したモードとなる. Rammal and Toulouse (1983) は、 $\bar{d} < 2$  であるならば、その励起は空間的に局在していることを導いた. 彼らは、トポロジカルに乱れた系におけるエネルギー・スペクトルと、その系でのランダム・ウォークとの関係を利用したが、ここでは有限サイズ・スケーリングを用いた、より簡単な議論から彼らと同じ結論を引き出せることを示す.

パーコレーション系の伝導度は臨界濃度近くで  $\sigma \sim (p - p_c)^t$  で表せることは前に述べたが、これに有限サイズ・スケーリングの議論を適用すると、 $p \sim p_c$  で

$$(2.20) \quad \sigma \sim L^{-t/\nu}$$

となる. ここで  $L$  は系のサイズである. コンダクタンス  $G_L$  は、 $G_L$  の大きなところで、 $G_L \sim \sigma L^{d-2}$  となるので、その  $L$  依存性は

$$(2.21) \quad G_L \sim L^{-t/\nu + d - 2}$$

となる. ここで、フラクタル次元に対するスケーリング関係式

$$(2.22) \quad D = d - \frac{\beta}{\nu}$$

と (2.11) 式を用いると、 $G_L$  は

(2.23)

$$G_L \sim L^{(D/\bar{d})(\bar{d}-2)}$$

と書ける。このコンダクタンスから局在・非局在を判定する  $\beta_L = d[\ln G_L]/d[\ln L]$  を求めると、

(2.24)

$$\beta_L = \frac{D}{\bar{d}}(\bar{d}-2)$$

となる。これより、 $\bar{d}_s = 4/3$ ,  $\bar{d}_v = 0.8 \sim 0.9$  であるパーコレーション上のフラク톤は、 $\beta_L$  が負となり局在することが分かる。

局在したフラク톤の波動関数は、対角的乱れに対するアンダーソン局在とは異なることが予想される。Alexander 等は、フラク톤の局在波動関数に対して、

(2.25)

$$\phi_{fr} \sim \exp[-(r/\Lambda(\omega))^{d_\phi}]$$

の形を仮定した (Entin-Wohlman et al. (1985), Alexander et al. (1986))。ここで、 $\Lambda(\omega)$  は、フラク톤の局在長であり、 $d_\phi$  が局在の強さを表す指数となっている。特に、 $d_\phi > 1$  のとき、 $\phi_{fr}$  は“超局在”していると呼ばれる。 $d_\phi$  の値に関する理論 (Levy and Souillard (1987), Harris and Aharony (1987), Aharony et al. (1987)) はいくつか報告されているが、現在のところ、 $0.95 < d_\phi < 1.4$  ( $d=2$ ) の範囲で一致した見解は得られていない。これらの理論はいずれも、フラク톤の局在中心から十分離れたところでは、波動関数が中心対称性を持っていることを仮定している。後に述べるように、我々はこの仮定が正しくないことを明らかにし、従来考えられていたような  $d_\phi$  では波動関数を記述できないことを示した。いずれにしても、フラク톤の局在の様子を明確にすることは、フラク톤励起が関与したランダム系の諸物性を理解する上で極めて重要であり、系統的な研究が急がれる。

我々は、新しい計算機アルゴリズムとスーパーコンピューターを有効利用することによって、フラク톤の状態密度、モード・パターン、および分散関係を求めた。次章で我々が用いた計算のアルゴリズムを簡単に紹介する。

### 3. 数値計算アルゴリズム

格子系の振動問題を計算機を用いて調べる方法として最も一般的なものは、ダイナミカル・マトリックスと呼ばれる  $N \times N$  正方行列 ( $N$  は系の自由度) の固有値および固有ベクトルを求めるものである。この方法は、比較的小さな系の全固有振動数や全固有モードを求めるには単純で見通しがきくが、系が大きくなるとたちまち計算不可能になってしまうという欠点を持っている。これは、計算を実行するために必要なコンピューター上のメモリー・サイズが  $N^2$  に比例するためで、例えば 2 次元正方格子上的スカラー変位による振動問題を平均的な大型コンピューターで計算する場合には、一辺が 50 サイト程度の格子しか扱えないことになる。パーコレーション・ネット上の振動励起を考える際には、この制約は致命的である。そこで我々は、必要なメモリー・サイズが  $N$  に比例するような全く新しいアルゴリズム (Williams and Maris (1985)) を採用し、この制限を取り除いた。状態密度とモード・パターンは各々独立なアルゴリズムによって求められるが、そのどちらも基本的アイデアとして「系の固有振動数は、同じ振動数を持つ周期的外力に対し共鳴する」という事実を利用している。

単位質量の質点と、それらをつなぐバネ定数 1 の線形バネから構成されたパーコレーション・クラスターに対する運動方程式は

$$(3.1) \quad \ddot{u}_i(t) + \sum_j K_{ij} u_j(t) = 0$$

である。 $u_i$  は  $i$  番目の格子点上の質点の変位を示す。ここでは、変位はスカラーとして考える。 $K_{ij}$  は、 $j$  が  $i$  の最近接格子点であり、かつ両格子点共に質点がある場合は 1,  $i \neq j$  で、それ以外の場合は 0 をとるものとする。さらに、 $K_{ii}$  は、格子点  $i$  の最近接で質点により占有された格子点の数を  $z$  とすると、 $-z$  の値をとる。さて、(3.1) 式で表される系に周期的外力  $F_0 \cos(\phi_i) \cdot \cos(\omega t)$  を加えることを考える。ここで、 $F_0$  は定数であり、 $\phi_i$  は  $i$  に対してランダムな位相である。このような外力により、固有振動数  $\omega_i$  が  $\omega$  に近い固有状態は共鳴を起こし、その共鳴エネルギーは外力を加える時間  $t$  が增大すると共に  $\omega = \omega_i$  にピークを持つ  $\delta$ -関数のようになる。このことより、状態密度  $g(\omega)$  は

$$(3.2) \quad g(\omega) = \frac{8 \langle E(t, \omega) \rangle}{\pi t F_0^2 N}$$

と表すことができる。ここで、 $N$  は系の自由度であり、 $\langle E(t, \omega) \rangle$  は  $\phi_i$  について平均された系のエネルギーを表す。この式から我々は、ランダムな周期的外力を加えられた系の全エネルギーを計算することによって、状態密度を得ることができる。

単一モードを取り出すためにも強制振動による方法が有効である。状態密度を求めるときと同じような外力を加えて  $t \rightarrow \infty$  とすれば、系に縮退がない限り、外力の振動数  $\omega$  に最も近い振動数を持つ固有モードのみが相対的に増強される。しかし、これでは非常に長い CPU 時間を必要とするため効率的ではない。ここでは、モードの選択性を高めるために、次のような方法がとられた。

各質点の変位は、 $t=0$  のとき 0 で、外力も加わっていないものとする。次に、 $\tilde{t}$  時間だけ外力  $F_i \cos(\omega t)$  を加える。このとき、系がある程度共鳴を起こし、 $\omega$  に近い比較的多くの固有モードが増強されるような  $\tilde{t}$  を選ぶ。いま、 $\tilde{t}$  後の各質点の変位を  $u_i^{(1)}$  とする。次に、外力の振幅を  $F_i^{(1)} = u_i^{(1)}$  と変換し、系を初期状態に戻してから同じ手順を繰り返す。この操作を  $P$  回繰り返すと、振動の共鳴幅  $\Delta\Omega$  は非常に小さくなり、モードの選択性は向上する。このようにして、 $\tilde{t}$  と  $P$  を適当に選ぶことによって単一モードを得ることができる。

本研究で用いられたアルゴリズムは、状態密度にしても、モード・パターンにしても、系の運動方程式を数値的に解き、その時間発展を求めることを基本としている。これは、実際の計算において、系の自由度に比例するメモリー・スペースを要することを意味する。さらに、アルゴリズムが非常に単純なため、アレイ・プロセッサを持つスーパーコンピュータにおいて、プログラムは高度にベクトル化される。このため、我々は、通常アルゴリズムと通常大型計算機を用いたシミュレーションよりも、50 倍大きなシステムを 200 倍の計算速度で計算することができた。

#### 4. 結 果

ここで用いられた計算法は、次の 3 つの方法により、その精度がチェックされた。

- (i) 2次元規則系における状態密度
- (ii) 3次元規則系における状態密度
- (iii) 1次元不純物 (light mass impurity) 準位の波動関数

いずれも、厳密解が分かっており (Montroll and Potts (1955)), それらと数値計算による結果とが比較された。その結果、どれも十分な精度を持って厳密解を再現していることが分かっ



た。特に、これまで高精度の値を得るのが困難であった低振動数における状態密度に対しても、本方法は極めて有効であることが明らかとなった。

#### 4.1 状態密度

2次元および3次元のパーコレーション系に対して、上述の数値計算を行ない、フラクトンを実際に励起し、その状態密度を求めた (Yakubo and Nakayama (1987))。

2次元パーコレーション・クラスターは、 $700 \times 700$ の正方格子に作られ、濃度  $p=0.593$  ( $=p_c$ ) でサイト数 116,991 のものと、 $p=0.67$  でサイト数 317,672 のものが用意された。図3は、 $p=p_c$  での状態密度である。直線は、 $g(\omega) \sim \omega^{1/3}$  の guiding line である。この結果、 $\omega < 1$  から、計算された最低振動数に至るまで、状態密度は Alexander and Orbach (1982) の予想通り  $\omega^{1/3}$  に比例していることが分かる。これは、フラクトン次元  $\bar{d}_s$  が  $4/3$  に非常に近いことを意味している。系は臨界濃度にあるため、相関長  $\xi_p$  は発散しており、従ってフォノンは如何なる低振動数に対しても励起され得ない。このことは、図3にフォノン-フラク톤のクロスオーバーが見られないことに対応している。 $\omega \sim 1$  に対応する波長よりも短いスケールでは、系はもはやフラクタルとは見なせないで、状態密度は  $\omega \sim 1$  より上で  $\omega^{1/3}$  に比例しなくなる。

$p=0.67$  の2次元パーコレーション系の状態密度は図4に示されている。 $0.1 < \omega < 1$  の振動数領域で、状態密度は、やはり  $\omega^{1/3}$  に比例しているが、これより低振動数側では  $\omega$  に比例している。 $\omega$ -依存性の変化する振動数（ここでは、およそ 0.1）は系に特徴的な振動数であり、この振動数が第2章で述べたフォノン-フラクトン クロスオーバー振動数  $\omega_{pf}$  である。予想される通り、我々の計算において  $\omega_{pf} < \omega < 1$  ではフラクトン状態密度が、 $\omega < \omega_{pf}$  ではフォノン状態密度が各々得られた。Derrida et al. (1984) の有効媒質近似 (EMA) による計算では、クロスオーバー付近の状態密度は振動数の増加にともなって急激に上昇しているが、我々の計算では、そのような急勾配 (steepness) は見られない。 $\omega_{pf}$  が、系の密度相関を無視できなくなる最低振動数であることを考えると、EMA によって計算された  $\omega_{pf}$  近くでの状態密度の振舞いは正しくない可能性が強い。この点に関しては、第5章でもう一度議論される。

3次元パーコレーション・クラスターは、 $70 \times 70 \times 70$ の立方格子に濃度  $p=0.4$  ( $p_c =$

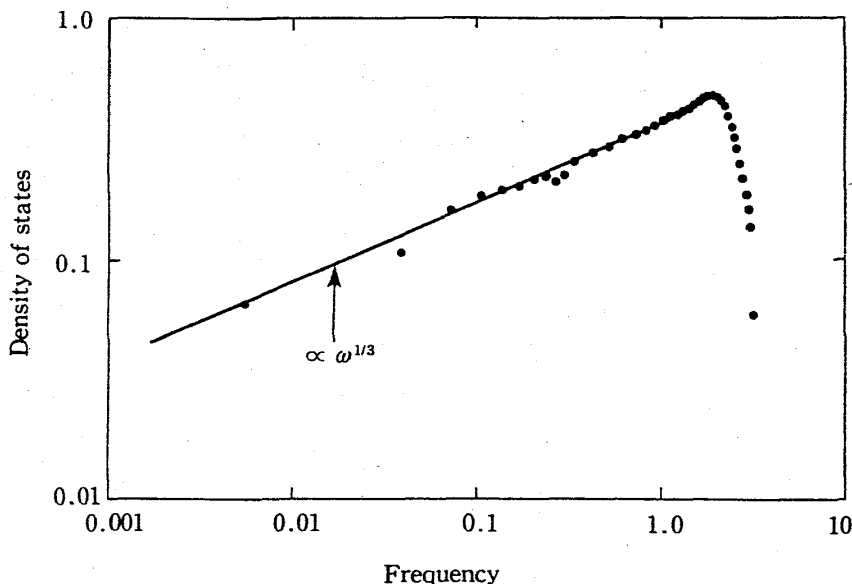


図3. 臨界濃度における2次元パーコレーション系の状態密度。クラスター・サイズは、116,991。

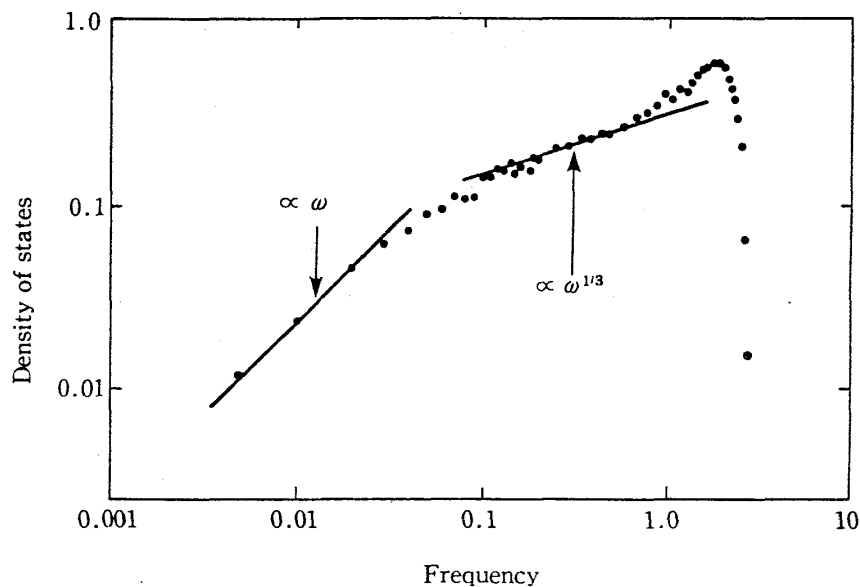


図4.  $p=0.67$ における2次元パーコレーション系の状態密度. クラスタ・サイズは, 317,672.

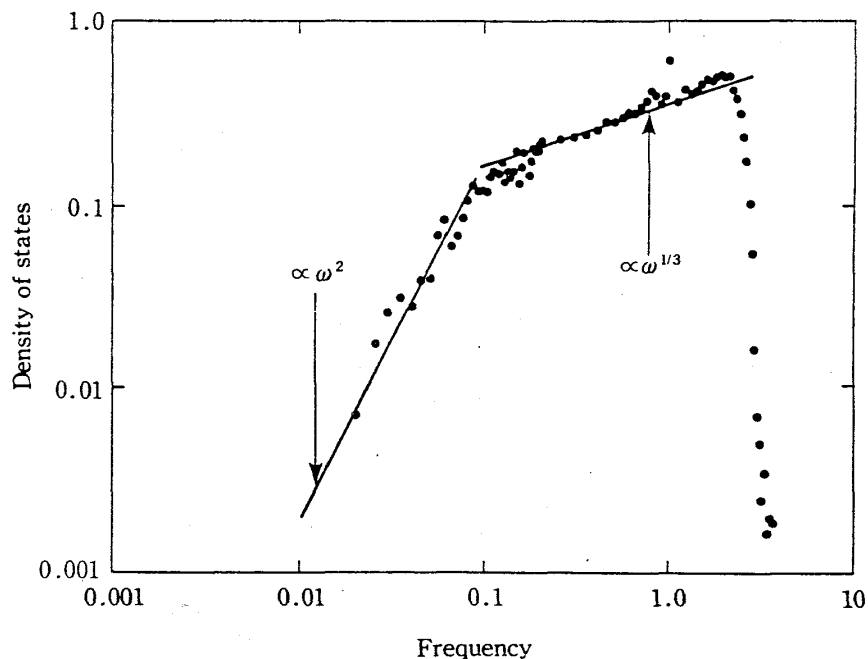


図5.  $p=0.4$ における3次元パーコレーション系の状態密度. クラスタ・サイズは, 122,448.

0.311)で作られた. クラスタ・サイズは122,448である. 図5は, 計算されたこの系の状態密度であるが, この場合もフォノン領域( $g(\omega) \sim \omega^2$ )とフラクトン領域( $g(\omega) \sim \omega^{1/3}$ )が存在している. この結果から, 少なくとも2次元と3次元においては, フラクトン次元 $\bar{d}_s$ は $d$ に依存せず $4/3$ であることが確かめられた. この系での $\omega_{pf}$ は, およそ0.1であるが, フォノンからフラクトンへのクロスオーバーは滑らかで, やはり, 急勾配は見られない.  $\omega=1$ に状態密度のピークが見られるが, これは比較的重いブロッツに, 1本のボンドでつながった1個の質点の振動モードに対応している.

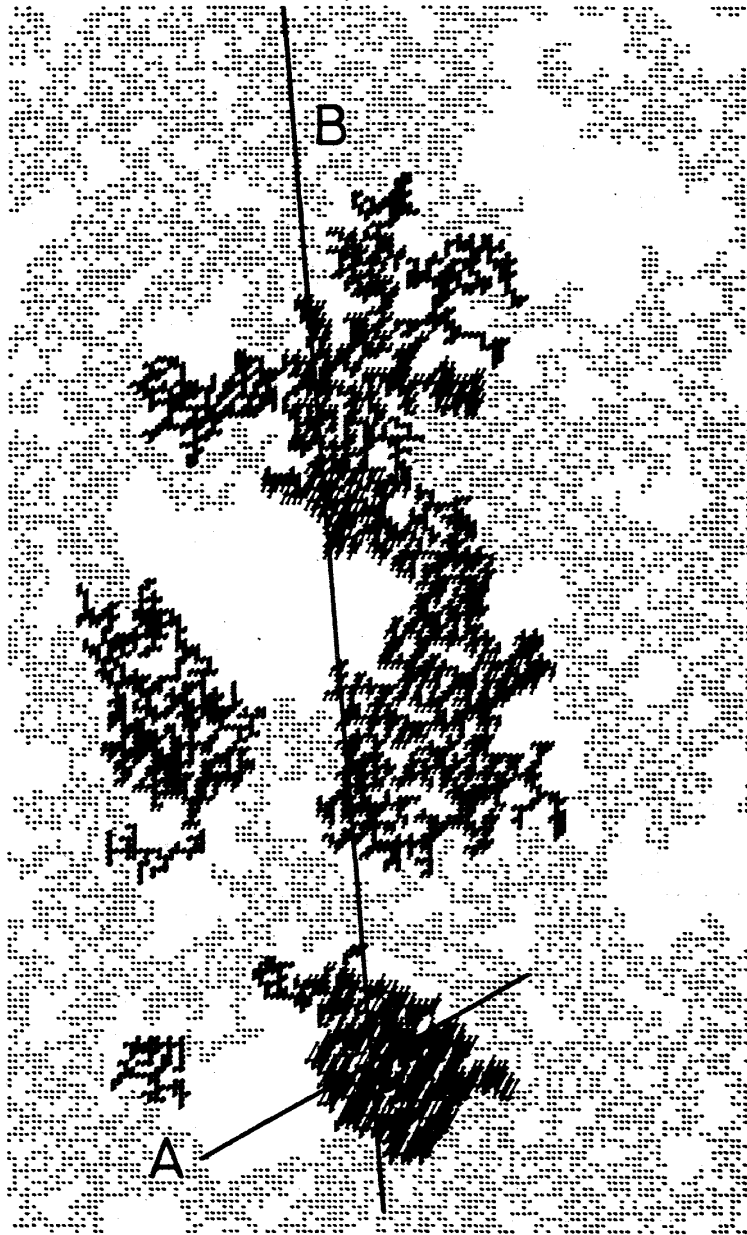


図6. 臨界濃度における2次元パーコレーション上に励起された $\omega=0.01$ のフラクトンモード・パターンの拡大図. クラスター・サイズは, 169,576. 振幅は矢印の長さで示している.

#### 4.2 モード・パターン

第3章で述べた方法により, 我々は2次元パーコレーション・クラスター上に励起されたフラクトンのモード・パターンを計算した. 図6は,  $700 \times 700$ の正方格子に $p=0.593$  ( $=p_c$ )で形成されたサイズ169,576のパーコレーション・クラスター上に $\omega=0.01$ のフラクトンを励起し, ある瞬間の変位パターンを矢印で表したものの拡大図である. この結果は, 第3章で述べた繰り返し回数 $P$ を16,  $\omega\tilde{t}=80$ として得られた. この励起は明らかに局在している. 特に振動の端の部分では鋭く, その振幅は減少している. この状況は, 図6に示されている線分Aに沿った断面図(図7(a))を見れば, よりはっきりする. ここで, 図7(a)の白丸は非占有サイトを表している. 振動はほとんどステップ関数的に振舞っていることから, 大振幅で振動しているこの部分(振動の「コア」と呼ぶことにする)はすべて同位相で一様に振動している

ことが分かる。このフラク톤の場合、コアは周囲の部分と1本のボンドで結合している（コアの上方）が、振幅はこの方向にゆっくりと減衰している（図7（b））。ここで重要なことは、コアからずっと離れたところにおいてさえも、モード・パターンは中心対称性を持たないということである。

単一のフラク톤は中心対称性を持たないとしても、特定の振動数を持つフラク톤の集合平均は、中心対称な平均波動関数を持つと期待される。我々は、 $700 \times 700$  の正方格子に臨界濃度の2次元パーコレーション系を9パターン作り、その上に、 $\omega = 0.01$  に極めて近い振動数を持つ129個のフラク톤を励起し、平均波動関数を求めた（図8参照）。白丸は、中心からの距

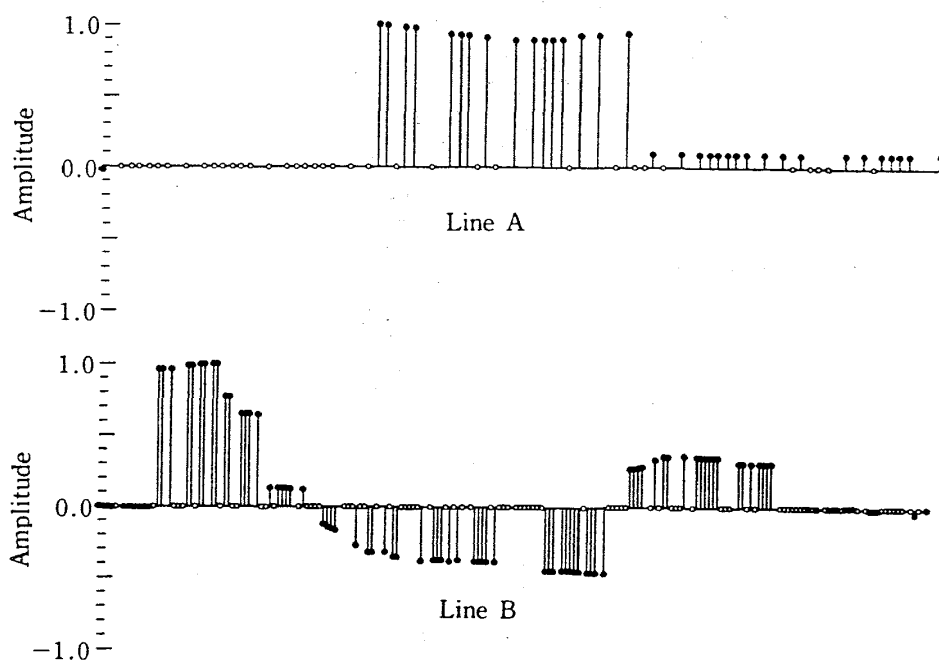


図7. 図6の線分AおよびBに沿った断面図.

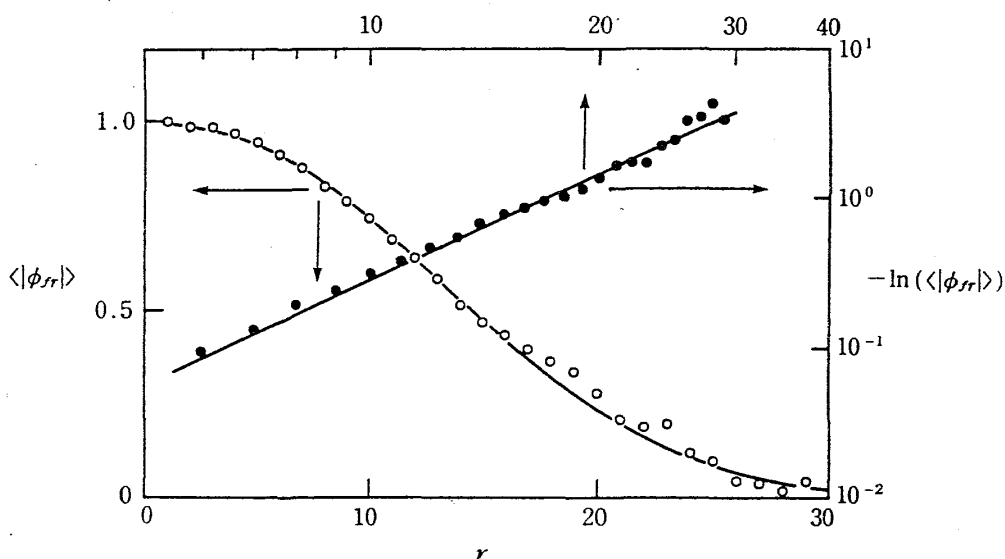


図8. 平均されたフラク톤波動関数。黒丸は中心からの距離  $r$  と平均振幅  $\langle |\phi_{fr}(r)| \rangle$  のプロットであり、白丸は  $r$  と  $-\ln \langle |\phi_{fr}(r)| \rangle$  の log-log プロットである。

表1. 異なる5つの振動数に対する局在長と指数  $d_\phi$  の値.

| 振動数 $\omega$ | 局在長 $\Lambda$ | $d_\phi$ |
|--------------|---------------|----------|
| 0.005        | 28.13         | 2.25     |
| 0.006        | 24.18         | 2.24     |
| 0.007        | 23.49         | 2.34     |
| 0.008        | 19.41         | 2.26     |
| 0.010        | 17.20         | 2.31     |

離  $r$  (格子間隔を1とする)に対する振幅の絶対値の平均  $\langle |\phi_{fr}(r)| \rangle$  を表しており, 黒丸は,  $r$  と  $-\ln(\langle |\phi_{fr}(r)| \rangle)$  の  $\log\text{-}\log$  プロットである. 黒丸を通る直線は, これらのデータに対し最小二乗法で引いた直線で, この直線の傾きが(2.25)式の  $d_\phi$  を与える(白丸を通る曲線は, この直線のリニア・プロットである). 我々の計算結果は,  $d_\phi = 2.3 \pm 0.1$ であることを示している. また, 局在長は,  $\Lambda(\omega=0.01)=17.2$ である. 図8からも分かる通り, この計算は,  $0 < r < 30$  に対して行なわれている. これは, ここで得られた  $d_\phi$  がコアの部分のみの平均波動関数を記述していることを意味している.

第2章でも述べた通り,  $d_\phi$  の値に関する理論的予測はまちまちであるが, 我々の結果はどの理論値(2次元で  $0.95 < d_\phi < 1.4$ )よりも大きな  $d_\phi$  を与えている. この不一致については次章で述べることにする.

最後に, これまで扱ってきた励起がフラクトンであることを確かめるために, フラクトンの分散関係である局在長  $\Lambda(\omega)$  の振動数依存性を計算した. これを計算するために, 異なる4つの振動数,  $\omega=0.005, 0.006, 0.007, 0.008$  を持つフラクトンを各々5つのパーコレーション・クラスター上に数多く励起させ, 上述と同じ方法で  $d_\phi$  と  $\Lambda(\omega)$  を求めた(表1参照). 指数  $d_\phi$  は, 計算精度の範囲内で振動数に依存しないが, 局在長は,  $\Lambda(\omega) \sim \omega^{-\lambda}$  のように振動数に依存することがこの表より分かる. 最小二乗法により  $\lambda$  を求めると,  $\lambda=0.71$  であり, スケーリング理論による結果,  $\lambda = \bar{d}_s/D = 0.705$  とよく一致している. 従って, 我々は確かにフラクトンを計算の対象としていたことになる.

## 5. 結 論

パーコレーション系に励起されたスカラー・フラクトンの基本的性質を解明するために, いくつかの数値実験が行なわれた. 巨大なシステムを取り扱う必要性から, 我々は新しい計算のアルゴリズムとスーパーコンピュータを用いてシミュレーションを行なった. まず, 2次元および3次元におけるフラクトン励起の状態密度を求めた. その結果, フラクトン励起を特徴づけるフラクトン次元  $\bar{d}_s$  は, いずれの場合も  $4/3$  に極めて近く, Alexander and Orbach (1982) による予想が確認された. パーコレーション系の相関長  $\xi_p$  よりも長波長の励起に対して, 状態密度は Debye 理論に従うことが分かった(フォノン領域). また, 状態密度は, フォノンとフラクトンのクロスオーバー領域において滑らかであり, 有効媒質近似によって予想されたような特別な急勾配は見られなかった. フラクトンの状態密度は, 近年実験的にも調べられているが (Rosenberg (1985), Dianoux et al. (1987), Fontana et al. (1987), Courtens et al. (1988)), クロスオーバー領域における急勾配の有無に関しては, 統一的な見解が得られていない. ただ, 共有結合性のサンプルに急勾配が多く見られ (Rosenberg (1985), Dianoux et al. (1987)), そうでないものにこれが見られないことから (Fontana et al. (1987), Courtens et al.

(1988)), 急勾配の原因は変角力にあると考えることもできる。これまでの数値計算は, すべてスカラー変位を対象としたものであるが, 第2章で述べた通り変角力等を考慮すると, 状態密度は  $\xi_p$ ,  $d_c$ ,  $\lambda$  の大小関係によって様々な振舞いを見せることになる。従って, 変角力のあるパーコレーション系における振動励起の振舞いを数値的に研究することは, フォノンからフラクトンへのクロスオーバーを解明するだけでなく, より現実的な系でのフラクトン励起の性質を明らかにする上でも重要なことである。

さらに, 本研究では2次元パーコレーション・クラスター上に単一のフラクトンを励起し, そのモード・パターンを視覚的に明らかにした。この結果から, フラクトンは空間的に強く局在したモードであることが明らかとなった。その局在の様子は, 局在中心(中心はどこに定義されるべきかはともかくとして)からはるかに遠いところにおいてさえも, 中心対称性を持たない。これは, 臨界濃度にあるパーコレーション・クラスターが無限に長い相関長を持つためである。また, これらのフラクトン波動関数の集合平均を考え, 平均的な局在パターンを(2.25)式に従って評価した。その結果, 局在の強さを示す指数  $d_\phi$  は既存の理論(Levy and Souillard (1987), Harris and Aharony (1987), Aharony et al. (1987))が予想する値よりもはるかに大きな値  $2.3 \pm 0.1$  をとることが分かった。理論との不一致は次のように説明される。従来のフラクトン波動関数に関する理論は, パーコレーション・クラスター上のある一点における振幅がユークリッド距離  $r$  離れた別の点に伝播するとき, 振幅の減衰は, この2点間の平均最短経路  $R(r)$  のみに依存することを仮定している。しかし, この仮定は上述したように, 相関長が発散するため, 正しくない ( $\langle \phi_{fr}(r) \rangle \neq \phi_{fr}(\langle r \rangle)$ )。従って, 我々が計算した  $d_\phi$  ( $\langle \phi_{fr}(r) \rangle \sim \exp[-(r/\Lambda(\omega))^{d_\phi}]$ ) と, 理論値の  $d_\phi$  ( $\phi_{fr}(\langle r \rangle) \sim \exp[-(r/\Lambda(\omega))^{d_\phi}]$ ) とが等しくなくても問題ではない。我々の  $d_\phi$  はフラクトンのコアの部分に対してのみ意味がある。おそらく, tailの部分を含めて平均操作を行なうと,  $r \gg \Lambda$  における  $\langle \phi_{fr}(r) \rangle$  は異なる値を持った  $d_\phi$  で記述されるであろう。さらに, 相関長が発散し, 単一のフラクトンが図6のように極めて不規則な形状をしているという事実は, 観測量に対応する行列要素の集合平均と平均波動関数を用いて得られた行列要素とが異なることをも意味する。従って, フラクトンが関与する物理現象を理解する際に重要なのは  $d_\phi$  ではなく, 例えば,  $\nabla \phi_{fr}$  や  $\text{div } \phi_{fr}$  等の量の集合平均が振動数やパーコレーション濃度によってどう振舞うかである。今後, これらの量に関するスケーリング理論や数値計算が活発に行なわれることが期待される。

## 謝 辞

本研究を進めるにあたって, 有益な御討論をして頂いた, R. Orbach 教授と, スーパーコンピュータの利用に関し便宜を計って頂いた, 北海道大学大型計算機センターに感謝の意を表します。

## 参 考 文 献

- Aharony, A., Entin-Wohlman, O. and Orbach, R. (1987). Scattering of fractons, the Ioffe-Regel criterion, and the 4/3 conjecture, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 132-135.
- Alexander, S., Entin-Wohlman, O. and Orbach, R. (1986). Phonon-fracton anharmonic interactions: The thermal conductivity of amorphous materials, *Phys. Rev. B*, **34**, 2726-2734.
- Alexander, S. and Orbach, R. (1982). Density of states on fractals: «fractons», *J. Phys. (Paris) Lett.*, **43**, L625-631.
- Coniglio, A. (1981). Thermal phase transition of the dilute s-state potts and n-vector models at the

- percolation threshold, *Phys. Rev. Lett.*, **46**, 250-253.
- Courtens, E., Vacher, R., Pelous, J. and Woignier, T. (1988). Observation of fractons in silica aerogels, *Europhys. Lett.*, **6**, 245-250.
- de Gennes, P.G. (1976). La percolation — un concept unificateur —, *La Recherche*, **7**, 919-927.
- Derrida, B., Orbach, R. and Yu, K.W. (1984). Percolation in the effective-medium approximation: Crossover between phonon and fracton excitations, *Phys. Rev. B*, **29**, 6645-6651.
- Dianoux, A.J., Page, J.N. and Rosenberg, H.M. (1987). Inelastic neutron scattering in the amorphous and the crystalline state: The phonon-fracton density of states, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 886-888.
- Entin-Wohlman, O., Alexander, S. and Orbach, R. (1985). Inelastic extended-electron-localized-vibrational-state scattering rate, *Phys. Rev. B*, **32**, 8007-8012.
- Feng, S. (1985). Crossover in spectral dimensionality of elastic percolation systems, *Phys. Rev. B*, **32**, 5793-5797.
- Fontana, A., Rocca, F. and Fontana, M.P. (1987). Direct experimental determination of the crossover frequency between phonon and fracton regimes and its scaling behavior in superionic silver borate glasses, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 503-506.
- Gefen, Y., Aharony, A. and Alexander, S. (1983). Anomalous diffusion on percolating clusters, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 77-80.
- Harris, A.B. and Aharony, A. (1987). Anomalous diffusion, superlocalization and hopping conductivity on fractal media, *Europhys. Lett.*, **4**, 1355-1360.
- Kantor, Y. and Webman, I. (1984). Elastic properties of random percolating systems, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1891-1894.
- Levy, Y.-E. and Souillard, B. (1987). Superlocalization of electrons and waves in fractal media, *Europhys. Lett.*, **4**, 233-237.
- Montroll, E.W. and Potts, R.B. (1955). Effect of defects on lattice vibrations, *Phys. Rev.*, **100**, 525-542.
- Rammal, R. and Toulouse, G. (1983). Random walks on fractal structures and percolation clusters, *J. Phys. (Paris) Lett.*, **44**, L13-22.
- Rosenberg, H.M. (1985). Inelastic neutron scattering in epoxy resins: The phonon-fracton density of states and the specific heat, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 704-706.
- Stanley, H.E. (1977). Cluster shapes at the percolation threshold: and effective cluster dimensionality and its connection with critical-point exponents, *J. Phys. A*, **10**, L211-220.
- Stauffer, D. (1985). *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London.
- Webman, I. and Grest, G.S. (1985). Dynamical behavior of fractal structures, *Phys. Rev. B*, **31**, 1689-1692.
- Williams, M.L. and Maris, H.J. (1985). Numerical study of phonon localization in disordered systems, *Phys. Rev. B*, **31**, 4508-4515.
- Yakubo, K. and Nakayama, T. (1987). Absence of the hump in the density of states of percolating clusters, *Phys. Rev. B*, **36**, 8933-8936.